

§4. エラーメッセージ

KOBEPACK/ 1 Version 1.0 では, TITPACK Version 2 に習ってエラーメッセージを付け加えた. 以下で, エラーメッセージの種類とその原因および対策を述べる. Eii の形のメッセージではメッセージの出力と同時に処理が終了する. Wii の形のメッセージの場合には処理は継続される.

E01: WRONG VALUE GIVEN TO IDIM IN SMALL.

[原因] SMALL での IDIM が, ACOS および SX 用の版を用いる場合 2 より小さく, SUN 用の版を用いる場合 3 より小さい.

[対策] ACOS および SX 用の版を用いる場合は $IDIM \geq 2$, また, SUN 用の版を用いる場合は $IDIM \geq 3$ となるような NS, ITSZ の組を NCONF, CRESZ に与える.

E02: NVEC GIVEN TO DIAGNLZ, CALLED FROM SMALL, OUT OF RANGE.

[原因] DIAGNLZ に与えられた NVEC が 0 より小さいか NE より大きい.

[対策] NVEC を 0 以上 NE 以下に指定する.

E03: NVEC GIVEN TO VEC3, CALLED ORIGINALLY FROM SMALL, OUT OF RANGE.

[原因] VEC3 に与えられた NVEC が 0 より小さいか NE より大きい.

[対策] NVEC を 0 以上 NE 以下に指定する.

E04: INCORRECT DATA IN IPAIR. LOCATION: i, j

[原因] サイト対の両端のサイトの番号を指定する配列 IPAIR の要素に 0 以下か NS+1 以上のものがある. その位置は IPAIR(i) か IPAIR(j) である.

[対策] IPAIR に与えたデータをチェックする. 特に IPAIR(1) から IPAIR(2*IBOND) までのすべてに正しいデータが与えられているかどうかを調べる.

E05: NS IS SMALLER THAN 2 OR LARGER THAN 24. NS=ii

[原因] NS に 2 より小さいか 24 より大きい値 (NS=ii) が与えられている.

[対策] NS に 2 以上 24 以下の値を与える.

E06: ITSZ IS LARGER THAN NS OR SMALLER THAN -NS. NS=ii, ITSZ=jj

[原因] ITSZ に NS より大きいか -NS より小さい値 (NS=ii, ITSZ=jj) が与えられている.

[対策] ITSZ に 0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm NS$ のうちのいずれかの値を与える.

E07: NSLMAX IS SMALLER THAN (NS+1)/2 OR LARGER THAN NS. NS=ii, NSLMAX=jj

[原因] NSLMAX に $[(NS+1)/2]$ より小さいか NS より大きい値 (NS=ii, NSLMAX=jj) が与えられている ($[\dots]$ はガウス記号).

[対策] NSLMAX に $[(NS+1)/2]$ 以上 $\text{Min}(NS, 12)$ 以下の値を与える.

E08: WRONG VALUE GIVEN TO NSLMAX IN CRESTA CALLED FROM CRESZ. NSLMAX=ii

[原因] CRESTA に与えられた NSLMAX (NSLMAX=ii) が 12 より大きい.

[対策] NSLMAX に $[(NS+1)/2]$ 以上 $\text{Min}(NS, 12)$ 以下の値を与える.

E09: WRONG VALUE GIVEN TO I IN ITOTBZ. I=iiiiii

[原因] ITOTBZ に与えられた I (I=iiiiii) が 0 より小さいか $3^{12}-1$ より大きい.

[対策] ITOTBZ に与えられる I の値は $0 \leq I \leq 3^{12} - 1$ を満たしていなくてはならない。KOBEPACK/ 1 Version 1.0 を用いる限りこのエラーメッセージが出力されることはないが、ユーザが ITOTBZ を直接メインルーチンから引用するときには注意が必要である。

E10: NDIM GIVEN TO BISEC, CALLED ORIGINALLY FROM SMALL, EXCEEDS 2000.

[原因] SUN 用の版の小規模行列用ルーチンで、行列の次元が 2000 を越える場合を扱おうとした。

[対策] SUN 用の版を用いる場合、小規模行列用ルーチンでは行列の次元が 2000 を越える場合は扱えない。中規模以上行列用ルーチンを用いる。

E11: NE GIVEN TO BISEC, CALLED ORIGINALLY FROM SMALL, OUT OF RANGE.

[原因] BISEC に与えられた NE が 0 より小さいか NDIM より大きい。

[対策] NE を 0 以上 $IDIM = IBASE(NSB)$ (行列の次元) 以下に指定する。

W01: NULL VECTOR GIVEN TO CHECKS.

[原因] CHECKS に与えられたベクトルのノルムが 10^{-30} より小さい。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] 間違ってもノルムが 0 のベクトルを与えたわけではなく、ノルムの小さいベクトルを本当に調べたいのであれば、それを 1 に規格化しておいてから CHECKS に与えなければならない。(規格化されたベクトルを与えないと HEXPC にハミルトニアン of the 正しい期待値が返されない。) なお、SMALL から返されるベクトルはすべて規格化されている。

W02: ID EQUALS TO IS IN CHECKS.

[原因] CHECKS において、 $ID \neq IS$ の条件が満たされていないため、固有ベクトルの精度が調べられない。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] ID に IS と異なる値を与える。

W03: CANNOT DIAGONALIZE THE HAMILTONIAN IN SMALL.

[原因] SMALL において、 $NDCLRS \geq IDIM - 1$ かつ $(NDCLRV + 1) \times (MDCLRV + 1) \geq 8 \times IDIM$ ($IDIM = IBASE(NSB)$) の条件が満たされていないため、エネルギー固有値、固有ベクトルの計算が出来ない。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] 上記の条件を満たすように NDCLRS, NDCLRV, MDCLRV を与え直す。

W04: ERROR IN DCSMSS CALLED FROM SMALL. IERR=iiii

[原因] DCSMSS に与えられた変数の値のうちの一つかが満たすべき条件を満たしていないこと等のため、DCSMSS が異常終了した。そのときのエラーインディケータ IERR の値は IERR=iiii である。処理を中止してメインルーチンに戻る。

[対策] 日本電気株式会社発行のマニュアル⁹⁾を参照の上、変数の値を正しく与え直すこと等を行う。

W05: ERROR IN DCSMSN CALLED FROM SMALL. IERR=iiii

[原因] DCSMSN に与えられた変数の値のうちの一つかが満たすべき条件を満たしていないため、DCSMSS が異常終了した。そのときのエラーインディケータ IERR の値は IERR=iiii である。処理を中止してメインルーチンに戻る。

[対策] 日本電気株式会社発行のマニュアル⁹⁾を参照の上、変数の値を正しく与え直す。

W06: CANNOT DIAGONALIZE THE HAMILTONIAN IN SMALL.

[原因] SMALL において、ACOS および SX 用の版を用いる場合には、 $NDCLRS \geq IDIM - 1$ かつ $(NDCLRV + 1) \times (MDCLRV + 1) \geq 5 \times IDIM$ ($IDIM = IBASE(NSB)$) の条件が、また、SUN 用の版を用いる場合には、 $NDCLRS \geq IDIM - 1$ かつ $(NDCLRV + 1) \times (MDCLRV + 1) \geq 6 \times IDIM$ ($IDIM = IBASE(NSB)$) の条件が満たされていないため、エネルギー固有値の計算が出来ない。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] 上記の条件を満たすように NDCLRS, NDCLRV, MDCLRV を与え直す。

W07: ARRAY SIZE FOR VEC IN SMALL IS TOO SMALL.

[原因] SMALL において、 $NDCLRV \geq IDIM - 1$ ($IDIM = IBASE(NSB)$) かつ $MDCLRV \geq NVEC - 1$ の条件が満たされていないため、VEC に求められた固有ベクトルを与えずに、メインルーチンに戻る。なお、この場合でも、VECS には求められた固有ベクトルがすべて返されている。

[対策] 上記の条件を満たすように NDCLRV, MDCLRV を与え直す。

W08: NULL VECTOR GIVEN TO CHECKM.

[原因] CHECKM に与えられたベクトルのノルムが 10^{-30} より小さい。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] 間違っってノルムが 0 のベクトルを与えたわけではなく、ノルムの小さいベクトルを本当に調べたいのであれば、それを 1 に規格化しておいてから CHECKM に与えなければならない。(規格化されたベクトルを与えないと HEXPC にハミルトニアン of the 正しい期待値が返されない。) なお、LNCZMINV から返されるベクトルはすべて規格化されている。

W09: ID EQUALS TO IS IN CHECKM.

[原因] CHECKM において、 $ID \neq IS$ の条件が満たされていないため、固有ベクトルの精度が調べられない。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] ID に IS と異なる値を与える。

W10: WRONG VALUE GIVEN TO MDCLRV IN LNCZM.

[原因] LNCZM に与えられた MDCLRV が 1 より小さい。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] MDCLRV に 1 以上の値を与える。

W11: WRONG VALUE GIVEN TO NVEC IN LNCZM. ONLY THE EIGENVALUES ARE CALCULATED.

[原因] LNCZM に与えられた NVEC が 0 より小さい。NVEC を 0 に置き換えて、エネルギー固有値のみを計算する。

[対策] NVEC に 0 以上 4 以下の値を与える。

W12: WRONG VALUE GIVEN TO NVEC IN LNCZM. NVEC IS REPLACED BY 4.

[原因] LNCZM に与えられた NVEC が 4 より大きい。NVEC を 4 に置き換えて、計算を続行する。

[対策] NVEC に 0 以上 4 以下の値を与える。

W13: ITERATION IN LNCZ2E, CALLED FROM LNCZM, EXCEEDS THE MAXIMUM (1000).

[原因] LNCZ2E でのエネルギー固有値 E(1), E(2), E(3), E(4) の計算において, Lanczös 法の反復が E(2) に対する 10^{-13} の相対誤差では 1000 ステップ以内で収束しなかった. E(1), E(2), E(3), E(4) に近似値が返される. なお, 3.2 節 [4] (LNCZM の説明) の [使用上の注意] の項を参照されたい.

[対策] これらの近似値を用いて LNCZMINV で固有ベクトルを計算し, さらに CHECKM で HEXPC を計算すれば, 一般的に云って, その値はより精度の高いエネルギー固有値を与える.³⁾ または, LNCZ2E の PARAMETER 文中の ITRMAX の値 (反復のステップ数の最大値) を大きくするか, ERRLLNCZ の値 (収束判定のための相対誤差の上限値) を大きくする. なお, 行列の次元が小さい場合には, 小規模行列用ルーチンを用いることも出来る.

W14: NEGATIVE VALUE GIVEN TO ITR IN LNCZMINV. ITR=iiii

[原因] LNCZMINV に与えられた ITR (ITR=iiii) が負である. 何もせずにメインルーチンに戻る.

[対策] W18, W19, W20 での問題を解決する (W18, W19, W20 のエラーメッセージが出力されなければ, 負の値の ITR が LNCZMINV に与えられることはないはずである).

W15: WRONG VALUE GIVEN TO NVEC IN LNCZMINV. NVEC IS REPLACED BY i.

[原因] LNCZMINV に与えられた NVEC が MDCLRV-1 より大きい. NVEC を i(=MDCLRV-1) に置き換えて, Lanczös 法のみを用いた固有ベクトルの計算を行う.

[対策] Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて固有ベクトルを計算する場合には, MDCLRV に NVEC+2 以上の値を与え, Lanczös 法のみを用いて固有ベクトルを計算する場合には MDCLRV に NVEC+1 を与える.

W16: WRONG VALUE GIVEN TO NVEC IN LNCZMINV.

[原因] LNCZMINV に与えられた NVEC が 0 より小さい. NVEC を 0 に置き換えた後, 処理を中止してメインルーチンに戻る.

[対策] NVEC に 0 以上 4 以下の値を与える.

W17: WRONG VALUE GIVEN TO NVEC IN LNCZMINV. NVEC IS REPLACED BY 4.

[原因] LNCZMINV に与えられた NVEC が 4 より大きい. NVEC を 4 に置き換えて, E(1), E(2), E(3), E(4) に対応する固有ベクトルをすべて計算する.

[対策] NVEC に 0 以上 4 以下の値を与える.

W18: TRIDIAGONALIZATION UNSUCCESSFUL IN MACRO2 CALLED ORIGINALLY FROM LNCZM. BETA(LK) IS TOO SMALL AT LK=iii.

[原因] MACRO2 で Lanczös 法による 3 重対角化のための LK=iii 番目のステップを実行中, 副対角要素 BETA(LK) が LK=iii で小さくなりすぎたため 3 重対角化に失敗した. 処理を中止してメインルーチンに戻る.

[対策] LNCZM に与える IV(1), IV(2), ..., IV(20) の値を変更する. また, 行列の次元が小さい場合には, 小規模行列用ルーチンを用いる.

W19: ERROR IN DCSTSN CALLED ORIGINALLY FROM LNCZM. IERR=iiii

[原因] DCSTSN に与えられた変数の値のうちのいくつかを満たすべき条件を満たしていないため、DCSTSN が異常終了した。そのときのエラーインディケータ IERR の値は IERR=iiii である。処理を中止してメインルーチンに戻る。

[対策] 日本電気株式会社発行のマニュアル⁹⁾を参照の上、変数の値を正しく与え直す。

W20: ERROR IN DCSTSS CALLED ORIGINALLY FROM LNCZM. IERR=iiii

[原因] DCSTSS に与えられた変数の値のうちのいくつかを満たすべき条件を満たしていないこと等のため、DCSTSS が異常終了した。そのときのエラーインディケータ IERR の値は IERR=iiii である。処理を中止してメインルーチンに戻る。

[対策] 日本電気株式会社発行のマニュアル⁹⁾を参照の上、変数の値を正しく与え直すこと等を行う。

W21: DID NOT CONVERGE FOR THE i-TH VECTOR IN INVERS2 CALLED FROM LNCZMINV.

[原因] エネルギー固有値 E(i) に対応する固有ベクトルの計算の際、INVERS2 で逆反復法が 1-5 回以内で 0.5×10^{-11} 以内に収束しなかった。近似的な固有ベクトルが返される。なお、3.2 節 [5] (LNCZMINV の説明) の [使用上の注意] の項を参照されたい。

[対策] 精度の高いエネルギー固有値を LNCZMINV の E(i) に与える。あるいは、LNCZMINV の MDCLRV に NVEC+1 を与えて、Lanczös 法のみを用いた固有ベクトルの計算を行う。

W22: I EXCEEDS IDIM IN CHKWV.

[原因] ICYCLST(1, j), ICYCLST(2, j), ..., ICYCLST(NS, j) および ICYCLNO(1, j), ICYCLNO(2, j), ..., ICYCLNO(NS, j) がすべての j (j=1, 2, ..., NV) に対しては存在しなかった。存在するだけのものを求めてメインルーチンに戻る。

[対策] NV の値を小さくする。NV=1 とすれば、このエラーメッセージが出力されることはないはずである。

W23: ICYCL IS NOT FOUND IN CHKWV.

[原因] プログラム破壊あるいはそれに相当する原因以外でこのエラーメッセージが出力されることはないはずである。

[対策] このエラーメッセージが出力された場合には、鍋木または利根川まで連絡してください。

W24: TOTAL SZ IS NOT ZERO IN FIND0.

[原因] FIND0 において $NH(0)+NL(0) \neq NS$ であるため、ISTN0 が求められない。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] ITSZ に 0 を与えて CRESZ を実行後、FIND0 への入力変数の値が変更されていないかどうかを調べる。

W25: WRONG VALUE(S) GIVEN TO ISTH AND/OR ISTL IN FINDHL. ISTH=iiiiii, ISTL=jjjjjj

[原因] FINDHL に与えられた ISTH (ISTH=iiiiii) が 0 より小さいか $3^{NS-NSLMAX}-1$ より大きい。かつ (または)、FINDHL に与えられた ISTL (ISTL=jjjjjj) が 0 より小さいか $3^{NSLMAX}-1$ より大きい。何もせずに FINDHL を引用したルーチンに戻る。

[対策] ISTH に $0 \leq ISTH \leq 3^{NS-NSLMAX}-1$ を満たす値を、また、ISTL に $0 \leq ISTL \leq 3^{NSLMAX}-1$ を満たす値を与える。KOBEPACK/1 Version 1.0 を用いる限りこのエラーメッセージが出力される

ことはないが、ユーザが FINDHL を直接メインルーチンから引用するときには注意が必要である。

W26: TOTAL SZ IS INCONSISTENT IN FINDHL.

[原因] FINDHL において $NH(0)+NL(0) \neq (ISTH \text{ を } 3 \text{ 進法表示したときの各桁の数値の和}) + (ISTL \text{ を } 3 \text{ 進法表示したときの各桁の数値の和})$ であるため、ISTN が求められない。何もせずに FINDHL を引用したルーチンに戻る。

[対策] ITSZ に $(ISTH \text{ を } 3 \text{ 進法表示したときの各桁の数値の和}) + (ISTL \text{ を } 3 \text{ 進法表示したときの各桁の数値の和})$ の値を与えて CRESZ を実行後、FINDHL への入力変数の値が変更されていないかどうかを調べる。KOBEPACK/ 1 Version 1.0 を用いる限りこのエラーメッセージが出力されることはないが、ユーザが FINDHL を直接メインルーチンから引用するときには注意が必要である。

W27: ISTN IS NOT FOUND IN FINDHL.

[原因] プログラム破壊あるいはそれに相当する原因以外でこのエラーメッセージが出力されることはないはずである。

[対策] このエラーメッセージが出力された場合には、鍋木または利根川まで連絡してください。

W28: WRONG SITE NUMBER GIVEN TO AAAAAA.

[原因] 物理量計算用ルーチン AAAAAA (CRFNST1 など) に与えられたサイトの番号 (ISITE, JSITE) に 0 以下または NS+1 以上のものがある。何もせずにメインルーチンに戻る。

[対策] ISITE, JSITE に 1 以上 NS 以下の値を与える。

W29: IBASE ERROR IN STRODRX. IBS=ii, INBH=jj, INBL=kk

[原因] プログラム破壊あるいはそれに相当する原因以外でこのエラーメッセージが出力されることはないはずである。

[対策] このエラーメッセージが出力された場合には、鍋木または利根川まで連絡してください。

§5. 提供方法など

KOBEPACK/ 1 Version 1.0 を 5 インチフロッピーディスク (2HD: 1.2MB, 15 セクタ/トラック) または 3.5 インチフロッピーディスク (2DD: 720KB, 9 セクタ/トラック) で提供する。フロッピーディスクに含まれるファイルは以下の通りである。

ファイル名	内 容
KP1NEC	KOBEPACK/ 1 Version 1.0 (ACOS および SX 用の版)
KP1SUN	KOBEPACK/ 1 Version 1.0 (SUN 用の版)
SMLMAIN	小規模行列用ルーチンを用いるサンプルプログラム (両方の版で使用できる)
MEDMAIN	中規模以上行列用ルーチンを用いるサンプルプログラム (両方の版で使用できる)
MANU0.TEX	本利用説明書 (表紙) の日本語 Micro T _E X 用ファイル
MANU1.TEX	本利用説明書 (まえがき, 目次, §1) の日本語 Micro T _E X 用ファイル
MANU2.TEX	本利用説明書 (§2) の日本語 Micro T _E X 用ファイル
MANU3.TEX	本利用説明書 (§3) の日本語 Micro T _E X 用ファイル
MANU4.TEX	本利用説明書 (§4, §5, 参考文献) の日本語 Micro T _E X 用ファイル
MANU5.TEX	本利用説明書 (Appendix A) の日本語 Micro T _E X 用ファイル
SMLFC.P1	SMLFC.ATR と合わせて, 小規模行列用ルーチンのフローチャートの ARUGA (P1.EXE) 用ファイル
MEDFC1.P1	MEDFC1.ATR と合わせて, 中規模以上行列用ルーチンのフローチャート (前半) の ARUGA (P1.EXE) 用ファイル
MEDFC2.P1	MEDFC2.ATR と合わせて, 中規模以上行列用ルーチンのフローチャート (後半) の ARUGA (P1.EXE) 用ファイル
SMLMA.JXW	SMLMA.ATR, SMLMA.CTL と合わせて, 小規模行列用ルーチンを用いるサンプルプログラム (SMLMAIN と同じ) のソースリストの一太郎用ファイル
SMLRE.JXW	SMLRE.ATR, SMLRE.CTL と合わせて, SMLMAIN 実行させて得られた結果の一太郎用ファイル
MEDMA.JXW	MEDMA.ATR, MEDMA.CTL と合わせて, 中規模以上行列用ルーチンを用いるサンプルプログラム (MEDMAIN と同じ) のソースリストの一太郎用ファイル
MEDRE.JXW	MEDRE.ATR, MEDRE.CTL と合わせて, MEDMAIN 実行させて得られた結果の一太郎用ファイル

KP1NEC, KP1SUN, SMLMAIN, MEDMAIN の計算機への転送や KP1NEC, KP1SUN のソースリストの出力は各自で行っていただきたい。また, KOBEPACK/ 1 Version 1.0 の内容についての問い合わせには出来るだけ誠意をもって回答するが, コンパイルの仕方など計算機システムの利用方法に関する問題は各自で

処理していただきたい。問い合わせは下記のいずれかになるべく手紙, ファックスまたは電子メールでお願いします。

利根川 孝

住所: 657 神戸市灘区六甲台町 1 番 1 号 神戸大学理学部

TEL: 078-881-1212 内線 4391

FAX: 078-881-7593

E-mail: tonegawa@icluna.kobe-u.ac.jp

楠木 誠

住所: 657 神戸市灘区鶴甲 1 丁目 2 番 1 号 神戸大学国際文化学部

TEL: 078-881-1212 内線 6222, 6223

FAX: 078-881-0610

E-mail: kabu@icluna.kobe-u.ac.jp

KOBEPACK/ 1 Version 1.0 の著作権は, TITPACK Version 2 から流用させていただいた部分 (サブルーチン副プログラム DIAGNLZ, HSHLDR, VEC3, VEC12, BISEC) を除いて, 筆者等に属する。学術研究上の目的で, 個人的に利用することについては特に制限はない。ただし, KOBEPACK/ 1 Version 1.0 をそのままあるいは改変して利用することによって得られた成果を発表する際には, 著作者名とプログラム名を明記して下さるようお願いする。なお, KOBEPACK/ 1 Version 1.0 は営業用の有償ソフトウェアではなく, バグその他の理由でユーザが被った不利益に対する補償は出来ない。

参考文献

- 1) 田口善弘, 西森秀稔: 物性研究 **45** (1986) 299.
- 2) H. Nishimori and Y. Taguchi: Prog. Theor. Phys. Suppl. No.87 (1986) 247.
- 3) 西森秀稔: TITPACK Ver.2 操作説明書 (1991).
- 4) 西森秀稔: 物性研究 **56** (1991) 494.
- 5) M. Kaburagi, T. Tonegawa and T. Nishino: to be published in *Computational Approaches in Condensed Matter Physics*, Springer Proc. Phys., ed. S. Miyashita, M. Imada and H. Takayama (Springer, Berlin, 1992).
- 6) F. D. M. Haldane: Phys. Rev. B **25** (1982) 4925; **26** (1982) 5257 (Erratum).
- 7) T. Tonegawa and I. Harada: J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 2153.
- 8) M. den Nijs and K. Rommelse: Phys. Rev. B **40** (1989) 4709.
- 9) 科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引 <第2分冊> (日本電気株式会社, 1991); 科学技術計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引 <基本機能編第2分冊> (日本電気株式会社, 1990).
- 10) H. Q. Lin: Phys. Rev. B **42** (1990) 6561.
- 11) 戸川隼人: マトリクスの数値計算 (オーム社, 1987).
- 12) F. D. M. Haldane: Phys. Lett. **93A** (1983) 464; Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1153.
- 13) I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb and H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 799; Commun. Math. Phys. **115** (1988) 477.